

05

## Пластическая деформация [001]-монокристаллов никеля. Моделирование и эксперимент

© Е.А. Алфёрова,<sup>1</sup> Е.В. Фомин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
634050 Томск, Россия

<sup>2</sup> Челябинский государственный университет,  
454001 Челябинск, Россия  
e-mail: katerina525@mail.ru, fomin33312@gmail.com

(Поступило в Редакцию 7 марта 2018 г.)

С применением математического моделирования и натуральных экспериментов рассмотрены процессы пластической деформации на примере [001]-монокристаллов никеля. Установлено, что способность кристалла к самоорганизации пластической деформации существует на всех масштабных уровнях, но наиболее сильно проявляется на микроуровне. Установлены механизмы самоорганизации пластической деформации на микро- и мезоуровне. В первом случае это согласованное зарождение и аннигиляция дислокаций, а во втором — коррелированный сдвиг в параллельных плоскостях скольжения. Благодаря указанным процессам распределение компонент деформации по грани носит квазипериодический характер, что способствует сохранению целостности кристалла при нагружении.

DOI: 10.21883/JTF.2019.01.46971.107-18

### Введение

Пластическая деформация твердых тел реализуется за счет дефектов различной природы и протекает на различных масштабных уровнях. На сегодняшний день в руках исследователей сосредоточены различные инструменты для изучения природы пластической деформации. Это и эксперимент с последующим анализом полученных результатов и математическое моделирование соответствующих процессов.

В экспериментальных работах по изучению пластической деформации ГЦК-монокристаллов были установлены закономерности развития деформационного рельефа, предложены различные виды классификаций элементов рельефа, рассмотрены вопросы фрагментации, неоднородности и локализации деформации при различных условиях нагружения [1–5]. Был выявлен ряд закономерностей и механизмов пластической деформации, показан многоуровневый характер деформации и установлены черты самоорганизации [6–11].

В работах по моделированию [12–15] рассматривается формирование различного деформационного рельефа при образовании разного типа дислокационных структур, моделируется поведение дислокационного ансамбля, исследуются характеристические движения дислокаций под действием сдвиговых напряжений, исследуется взаимосвязь между атомистическим и макроуровнем. Кроме поведения дислокационных структур с помощью молекулярной динамики (МД) рассматриваются также напряженное состояние и изменение атомной структуры, например, [16], где исследовался отклик монокристалла под ударным воздействием — деформация образца осуществлялась за счет образования дефекта упаковки. В другой работе [17] с помощью МД авторы изучали

фазовые превращения (ОЦК в ГПУ, ОЦК в ГЦК) кристаллической решетки при пластической деформации металлов с ОЦК-структурой. При моделировании всегда интересно провести сопоставление полученных данных с натурным экспериментом.

Таким образом, совместное применение этих двух подходов позволяет всесторонне изучить закономерности пластической деформации и выявить ее закономерности.

Целью настоящей работы является выявление физических закономерностей процесса пластической деформации и ее самоорганизации на различных масштабных уровнях с применением теоретических и экспериментальных методов.

### 1. Материал и методика

В качестве объекта исследования был выбран монокристаллический никель (чистота 99.99%) с ориентацией оси сжатия [001] и боковыми гранями {110}. Деформировали сжатием образцы размером  $3 \times 3 \times 6$  мм на испытательной машине InstronElektroPuls E10000, скорость  $1.4 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ . Картину деформационного рельефа исследовали на оптическом микроскопе Leica DM 2500P и конфокальном лазерном сканирующем микроскопе Olympus LEXT OLS4100. Размер сканированного участка в каждом отдельном случае составлял  $0.066 \text{ mm}^2$  ( $0.256 \times 0.256 \text{ mm}$ ). Разрешение по глубине  $0.06 \text{ }\mu\text{m}$ .

Для определения величины локальной деформации был использован метод делительных сеток. Угольную сетку с базой  $100 \text{ }\mu\text{m}$  на недеформированной полированной поверхности образца получали напылением через медную сетку в вакуумном посту. Для уменьшения погрешности, связанной с отклонением размеров ячеек

медной сетки, их измерение проводили до и после деформации. Определение величин компонент главных деформаций  $e_x, e_y, e_z$  осуществляли по методике, изложенной в работе [18].

В качестве объекта моделирования использовали образец размером  $7.04 \times 7.04 \times 21.12$  nm. По оси  $X, Y$  (боковые грани кристалла  $\{110\}$ ) применялись периодические граничные условия, а по  $Z$  (ось сжатия [001]) неперIODические. Расчеты проводились в программном пакете LAMMPS [19], для определения межатомного взаимодействия взят потенциал EAM для никеля [20], который для каждого атома имеет вид

$$E_i = F \left( \sum_{j \neq i} \rho(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \varphi(r_{ij}),$$

где  $F$  — энергия погружения, являющаяся функцией атомной электронной плотности,  $\rho$  — электронная плотность,  $\varphi$  — парное потенциальное взаимодействие. Для численного решения уравнений движения используется алгоритм Верлета в скоростной форме с временным шагом  $dt = 0.05$  fs. Визуализация модели и анализ дислокационных структур проводились в Ovito [21].

Сначала был произведен нагрев образца до 300 К, для релаксации системы использовался баростат и термостат (NPT-ансамбль частиц). Для расчета деформации применялся NVE-ансамбль. В начале сжатия задавалась сила давления на образец  $2.4 \cdot 10^{-10}$  N, к торцевым поверхностям прикладывалась сила трения, определенная как сила нормального давления в этих областях, умноженная на коэффициент трения. Температура в процессе моделирования варьировалась в пределах 260–300 К, для поддержания температуры использовался термостат Берендсена. Тензор напряжения определяется как

$$\sigma_{ij} = \frac{\sum_k^N m_k v_{ki} v_{kj}}{V} + \frac{\sum_k^{N'} r_{ki} f_{kj}}{V}, \quad (1)$$

где  $N, N'$  — число атомов в системе,  $V$  — объем системы,  $m_k$  — масса  $k$ -й частицы,  $v$  — проекции скорости  $k$ -й частицы,  $r$  — положение  $k$ -й частицы,  $f$  — вектор силы  $k$ -й частицы. Второй член в формуле (1) виртуальный.

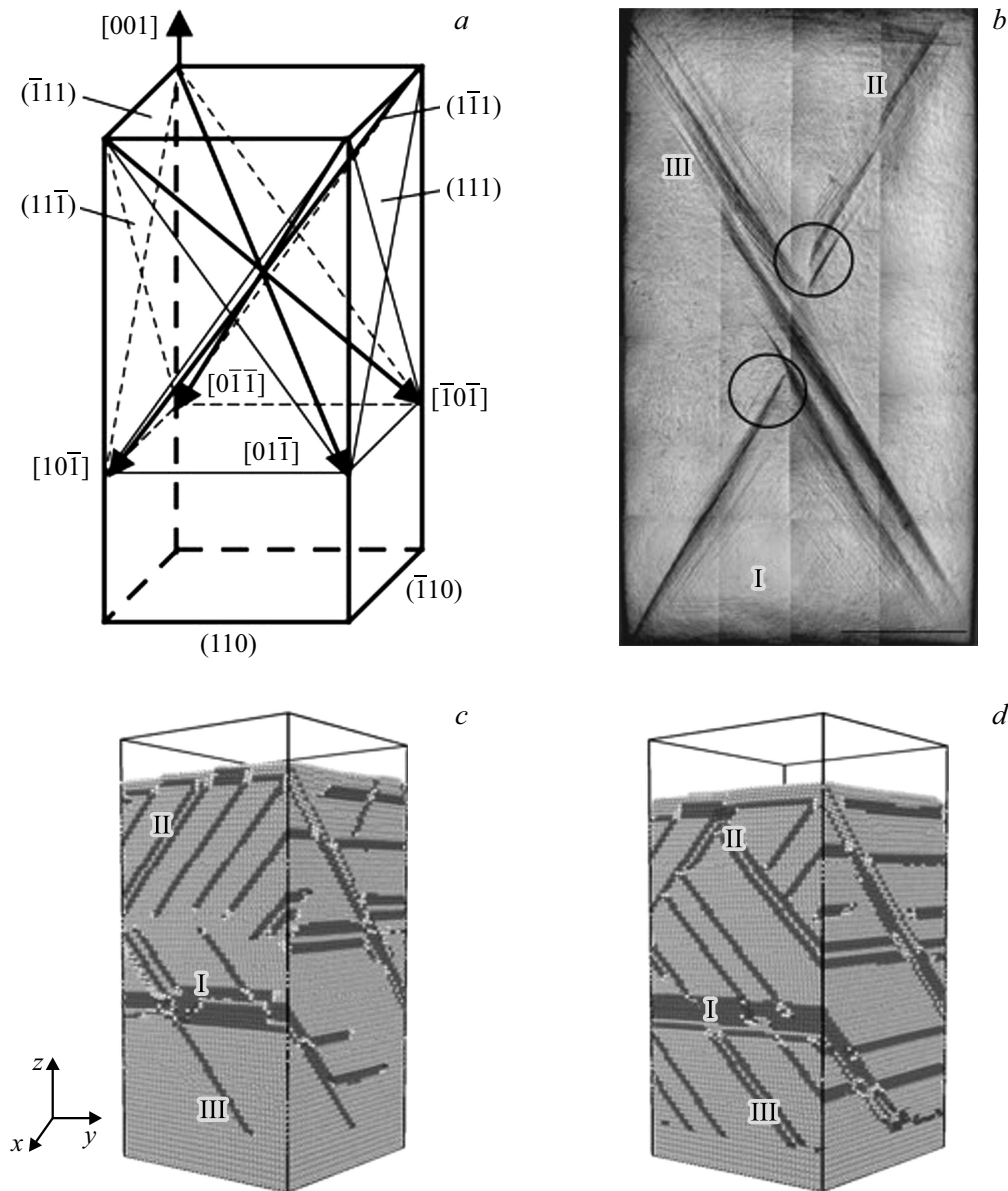
## 2. Эксперимент и моделирование

В настоящей работе совместно рассмотрены результаты моделирования пластической деформации сжатием монокристаллов никеля и экспериментальные результаты. Подчеркнем еще раз, что размеры образца при моделировании составляли  $7.04 \times 7.04 \times 21.12$  nm, а при эксперименте  $3 \times 3 \times 6$  mm, следовательно, описываемые ниже результаты можно отнести к различным масштабным уровням. Благодаря чему можно рассмотреть целостную картину на нескольких масштабах.

Для [001]-монокристаллов с боковыми гранями  $\{110\}$  число равнонагруженных систем сдвига с фактором Шмида 0.41 равно восьми (рис. 1, *a*). Однако изменения объема кристалла при сжатии образца требуют действия определенных систем скольжения в локальных объемах монокристалла. Еще одной кристаллографической особенностью рассматриваемой ориентации является возможность выхода любой из равнонагруженных плоскостей сдвига на свободную боковую поверхность. Благодаря этому сдвиг может протекать в направлении наименьшего внешнего сопротивления, т.е. в сторону свободных боковых поверхностей в отсутствие обратных напряжений от пуансонов испытательной машины. Рассмотрение действия одной из четырех октаэдрических плоскостей в центральном объеме кристалла показывает, что сдвиг по параллельным октаэдрическим плоскостям может беспрепятственно протекать вдоль любого из двух плотноупакованных направлений в сторону верхнего пуансона испытательной машины или нижнего. В верхней и нижней частях образец ограничен пуансонами и, следовательно, сдвиг в этих областях монокристалла осуществляется главным образом в направлении от пуансона. Резюмируя, отметим, что следует ожидать, что сдвиг в плоскости  $(\bar{1}\bar{1}1)$  от нижнего пуансона будет осуществляться вдоль направления  $[10\bar{1}]$  или  $[0\bar{1}\bar{1}]$ , а от верхнего —  $[\bar{1}01]$  или  $[011]$ . Основываясь на кристаллографической схеме, можно предположить, что наклонные системы следов сдвига грани  $(110)$  сформированы посредством сдвига по плоскостям и, а горизонтальные представляют собой результат сдвига по плоскостям и (рис. 1, *b*).

Анализируя результаты моделирования, видим, что как горизонтальные (I), так и наклонные системы (II и III) развиваются во всем диапазоне времени моделирования (рис. 1, *c-e*). Кроме того, можно отметить, что в начальный момент времени дефект упаковки образуется на множестве плоскостей, но с увеличением времени появляется устойчивый рельеф, который представляет собой совокупность наклонных и горизонтальной систем. Это можно связать с тем, что в начале скольжение дислокаций Шоуки интенсивно образуется и, встречаясь с противоположными по знаку дислокациями, исчезают. Со временем образуется большое количество пересечения дислокаций, и дальнейшее скольжение становится затрудненным. Процессы, происходящие в кристалле в начале пластической деформации, обусловлены сдвигом в кристалле и неестественными материальными поворотами [22], а источниками дислокаций в ряде работ называют микромасштабные поверхностные концентраторы напряжений [23], при этом релаксационные процессы реализуются встречными сдвигами.

При увеличении степени деформации образца картина несколько изменяется, что является следствием начала скольжения дислокаций после прорыва барьеров, сформировавшихся вначале нагружения; часть из них опять аннигилирует и возникает другая устойчивая структура.

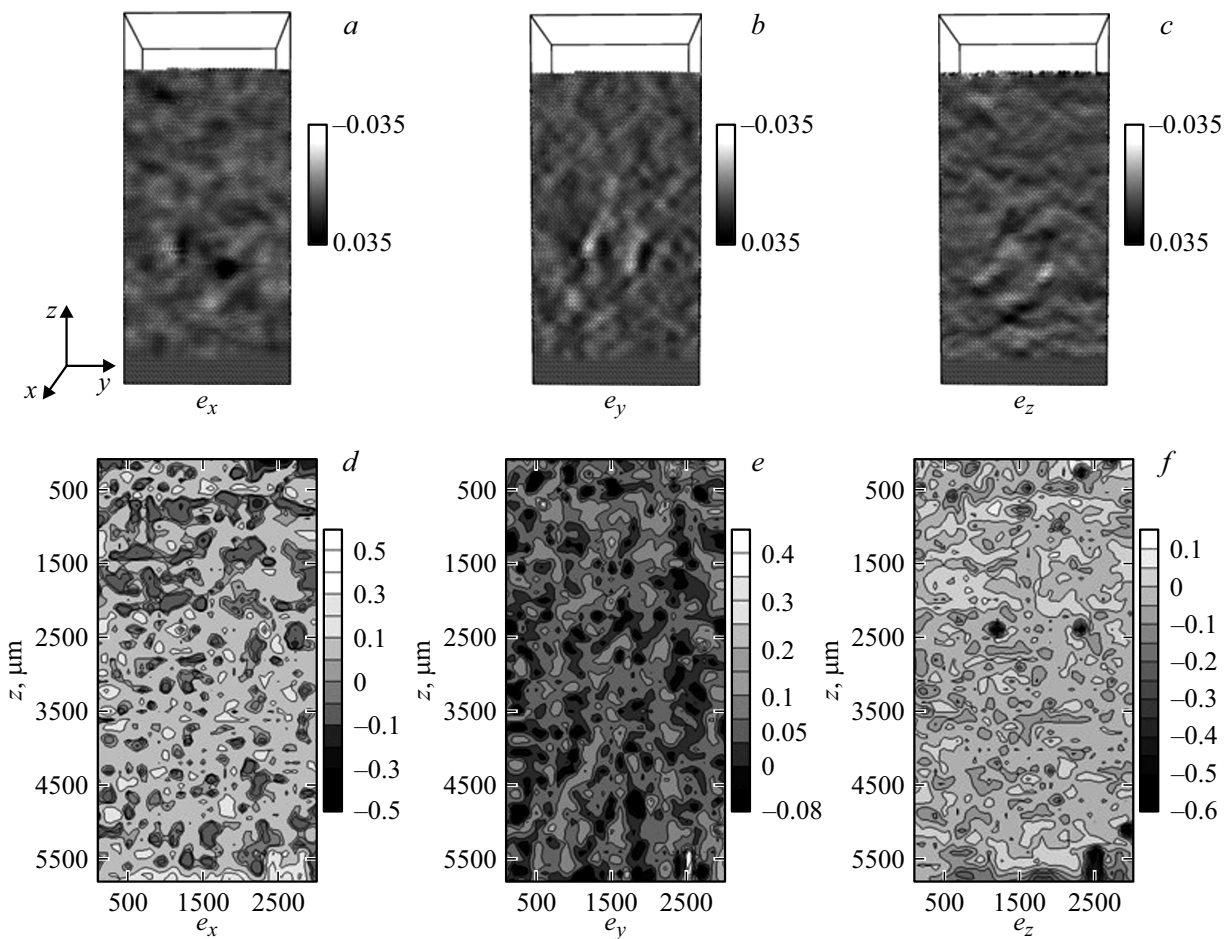


**Рис. 1.** Кристаллографическая схема  $[001]$ -монокристалла с боковыми гранями  $\{110\}$  (a); деформационный рельеф на боковой грани  $(110)$  при  $e = 6\%$  (b); рельеф образца, результаты моделирования при времени 18.35 (c) и 23.35 ps (d).

Кроме того, можно наблюдать, что действие наклонных систем сдвига происходит поочередно (рис. 1, c–e).

При моделировании на ранней стадии (до 12–14 ps) было отмечено возникновение сначала ОЦК, а потом и ГПУ-структуры. Их развитие происходило в слоистой структуре вдоль плотноупакованных плоскостей. Учитывая высокую энергию дефекта упаковки никеля, можно полагать, что дислокационное скольжение, развиваясь вдоль плотноупакованных плоскостей, может привести к созданию дислокационной структуры с очень высокой плотностью дефектов укладки в трансформированной ГЦК-фазе. Подобные результаты были получены в работе [24] при рассмотрении прокатки нанокристаллического никеля и в работе [16] при моделировании ударного сжатия монокристаллов никеля с ориентаци-

ями осей, сжатых в углах стандартного стереографического треугольника. В работе [25] при моделировании растяжения нанокристаллов меди вдоль оси  $[001]$  показано, что за пластическую деформацию ответственно термоупругое мартенситное превращение при котором ГЦК-решетка перестраивается в ГПУ. В работе [16] при моделировании ударной волны в монокристалле никеля также наблюдался переход ГЦК в ОЦК. Причем это характерно для систем, где нагружение идет вдоль оси типа  $[100]$ . В настоящей работе с использованием метода МД моделировалась деформация сжатием вдоль направления  $[001]$  и наблюдалась ударная волна, следовательно, можно полагать, что наблюдаемая трансформация кристаллической решетки относится к мартенситному превращению. В экспериментальном исследовании [26],



**Рис. 2.** Карты распределения компонент деформации на боковых гранях {110} монокристалла никеля с ориентацией оси сжатия [001]: моделирование при времени 24.85 ps (a–c); эксперимент,  $e = 6\%$  (d–f). Компоненты указаны на картах.

где рассмотрено фазовое превращение решетки ГЦК в ОЦК в кристалле никеля при прокатке образца, возникали переходы в другую фазу и сделан вывод, что при большой деформации мартенситное превращение возможно. В нашем исследовании при МД моделировании монокристалл был под большой нагрузкой, что и объясняет фазовый переход ОЦК в ГЦК. Такое же поведение никеля отмечено в работе [27], но в данном случае моделировались не ударные волны, а исследовались нелинейные эффекты при одноосном сжатии и растяжении (кроме молекулярной динамики применялся метод Монте-Карло). Такие переходы можно описать схемой Бейна [28]. В нашей работе при дальнейшем сжатии наблюдается переход из ОЦК в ГПУ решетку. В работе [17] показано, что при моделировании ударных нагрузок вдоль оси типа [100] ОЦК решетка в кристалле железа в основном переходит в ГПУ-решетку.

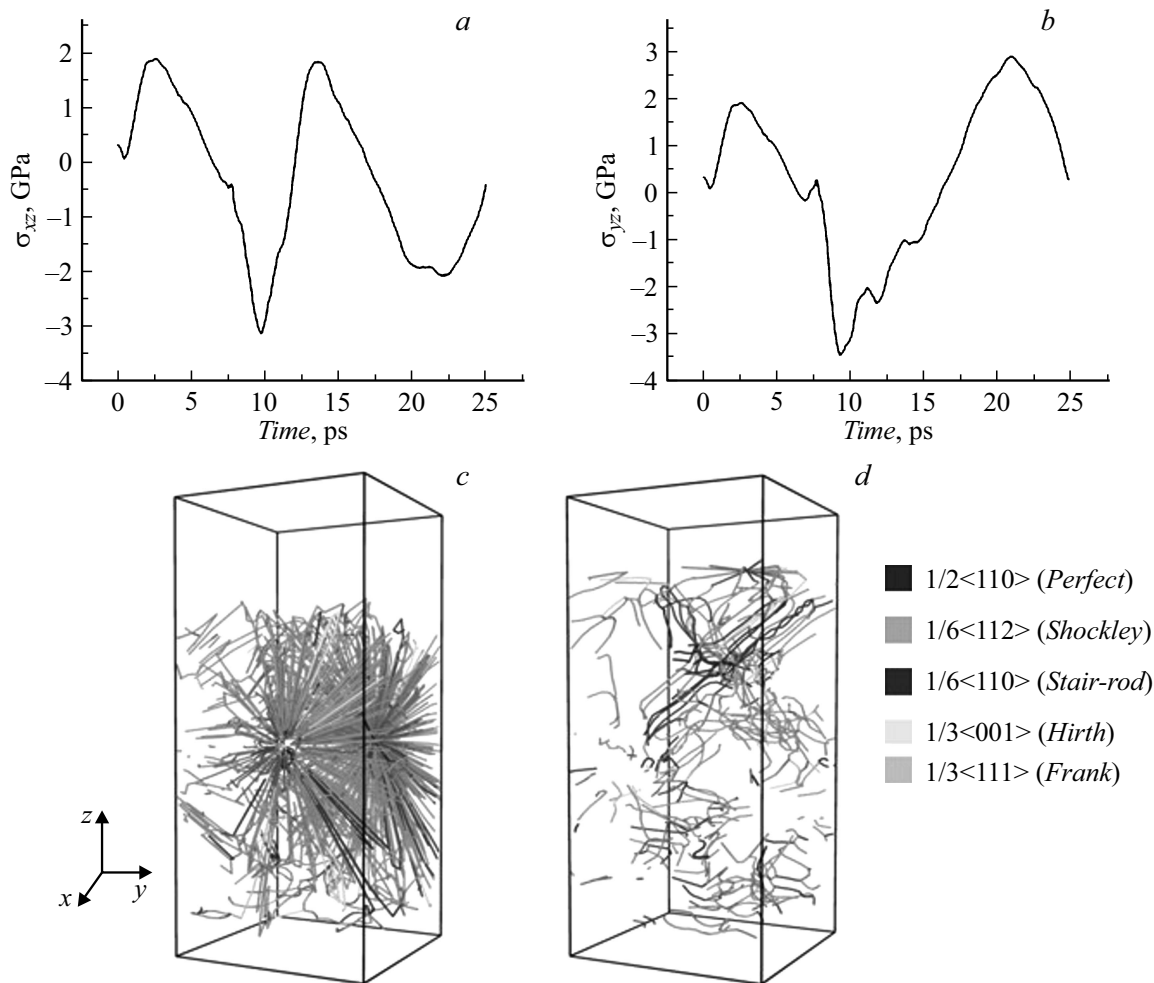
При натурном эксперименте на макроуровне была получена картина сдвига, представленная на рис. 1, b. Мы можем наблюдать наклонные системы следов сдвига, идущие от вершин образца (II и III), и горизонтальные следы (I), формирующиеся у торцов кристалла. При этом одна из макрополос явно получает большее

развитие. Вероятно, в первоначальный момент времени запускается одна система следов, высокая плотность дислокаций в которой затрудняет развитие второй системы.

Далее рассмотрим распределение компонент деформации. Результаты, полученные моделированием, показаны на рис. 2, a–c. Мы можем наблюдать квазипериодическое распределение локальных областей растяжения/сжатия как на поверхности образца, так и при продвижении вглубь кристалла. Места некоторой локализации деформации на поверхности располагаются вблизи стыка пачек следов (соответствующие области отмечены на рис. 1, b окружностями).

В эксперименте общая деформация монокристалла составляет  $e = 6\%$ , средние значения компонент деформации —  $\langle e_x \rangle = 0.04$ ,  $\langle e_y \rangle = 0.04$ ,  $\langle e_z \rangle = -0.07$  (здесь и далее знак „минус“ — это деформация сжатием, „плюс“ — растяжением). На рис. 2, d–f представлены карты распределения компонент  $e_x$ ,  $e_y$ ,  $e_z$  деформации.

Анализ карт показывает, что деформация распределена по граням достаточно однородно по всем компонентам. Местами некоторой локализации деформации являются приторцевые ребра образца, так как они яв-



**Рис. 3.** Зависимость касательных компонент тензора напряжения от времени  $\sigma_{xz}$  (a),  $\sigma_{yz}$  (b); дислокационная структура в момент времени 7 (c) и 13 ps (d).

ляются геометрическими концентраторами напряжений. По компоненте  $e_x$  в верхней приторцевой области реализуется как деформация растяжением ( $e_x = 0.15$ ), так и деформация сжатием ( $e_x = -0.25$ ), в нижней части грани  $e_x$  достигает значения 0.25; величины компонент  $e_y$  и  $e_z$  в приторцевых областях достигают максимальных значений 0.30 и  $-0.45$  соответственно. Следовательно, также можно говорить о чередовании локальных областей растяжения/сжатия (квазипериодический характер распределения компонент деформации).

Таким образом, и в моделировании, и в эксперименте мы наблюдали равномерное квазипериодическое распределение компонент деформации. Вместе с тем известно, что рельеф, сформировавшийся на поверхности, есть отражение внутренних процессов пластической деформации, произошедших в кристалле [29], поэтому на основе рассмотрения деформационного рельефа можно проанализировать внутренние процессы. В настоящей работе деформационный рельеф был изучен с применением фрактального анализа на основе корреляционной

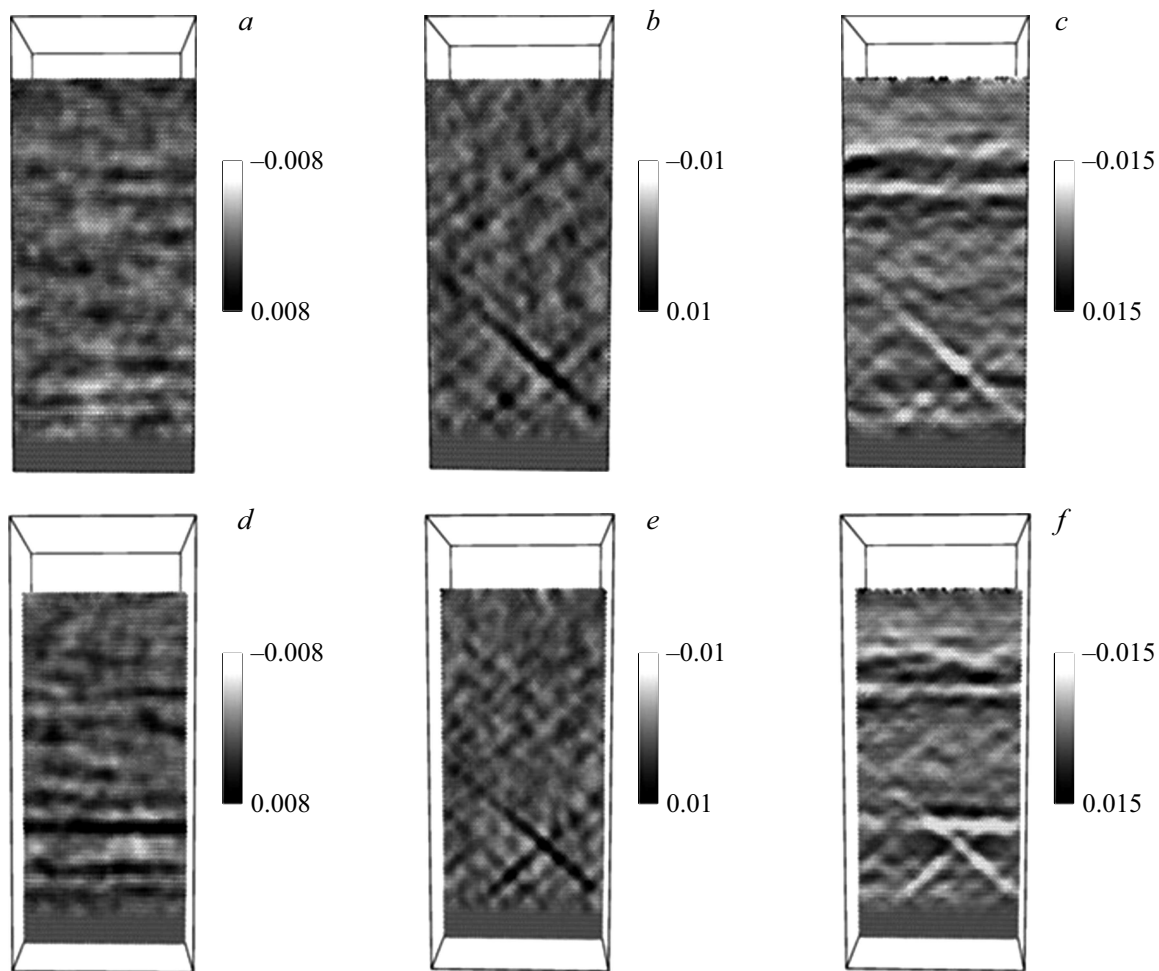
функции „высота–высота“  $H(r)$  [30,31]

$$H(r) = \langle [Z(r') - Z(r' - r)]^2 \rangle,$$

где  $Z(r)$  — функция высоты поверхности по всем парам точек, отстоящим друг от друга на фиксированное расстояние  $r$ , скобки указывают на усреднение по всем парам точек.

Далее по графику корреляционной функции  $H(r)$ , изображенному в логарифмических координатных осях, по наклону начального участка кривой определяется показатель Херста ( $H$ ), а по проекции линейного участка на ось абсцисс — корреляционная длина  $L$ . Показатель Херста  $H$  можно применить для анализа способности системы к самоорганизации [32].

Расчеты, проведенные для области занятой наклонной системой следов сдвига при деформации  $e = 6\%$ , дали следующие результаты. На корреляционной длине  $L_1 = 1.8 \mu\text{m}$  индекс Херста  $H_1 = 0.007$ , на  $L_2 = 21 \mu\text{m}$   $H_2 = 0.036$ , на  $L_3 = 67 \mu\text{m}$   $H_3 = 0.285$ , на  $L_4 = 122 \mu\text{m}$   $H_4 = 0.323$ . Корреляционные длины  $L_2-L_4$  по своему масштабу относятся к мезоуровню.



**Рис. 4.** Распределение компонент деформации в процессе образования дефекта упаковки, время моделирования 6.85 ps; компоненты деформации указаны на картах (*a–c*) на поверхности образца; срез внутри образца на глубину 3.52 nm от поверхности (*d–f*).

Значения показателя Херста меньше 0.5 указывают на то, что система имеет антиперсистентный, эргодический характер, т.е. стремится сохранить среднее значение анализируемого показателя. При этом чем ближе значение  $H$  к нулю, тем выше устойчивость системы. Значение  $H = 0.5$  свидетельствует об отсутствии корреляции [6]. Следовательно, наиболее устойчивой система является на корреляционной длине  $L_1$ , масштаб которой соответствует уровню дислокационной структуры. На поверхности кристалла это отражается в формировании рельефа в виде отдельных следов скольжения (при оптическом увеличении не разрешаются). Результаты моделирования показывают, что на микроуровне происходит чередование периодов интенсивного роста дислокаций и их аннигиляции. На рис. 3 показано поведение касательных напряжений, так как они отражают процессы зарождения и движения дислокаций, то по ним можно отследить поведение дислокационной структуры образца и картину распределения дислокаций в образце (рис. 3, *c, d*). На рис. 3, *a, b* поведение касательных напряжений схоже до 10 ps. Первый минимум

(примерно 1 ps) можно связать с образованием ударной волны, второй минимум (7 ps), более выраженный на рис. 4, *b*, соответствует появлению дефекта упаковки. В это время происходит интенсивный рост дислокаций, на рис. 4, *a, b* это отражается в падении напряжений, с 10–13 ps роста дислокаций не происходит и значение  $\sigma_{xz}$  увеличивается. Известно, что дефекту упаковки сопутствует избыток энергии, поэтому он стремится уменьшить свою площадь [33]. Последовательное рассмотрение карт распределения компонент деформации в процессе формирования дефекта упаковки показывает наличие мест локализации компонент деформации вдоль плотноупакованных октаэдрических плоскостей как по наклонным, так и по горизонтальной системе (рис. 4). Вместе с тем при сравнении картины распределения компонент на грани кристалла и внутри показывает чередование компонент растяжения/сжатия в направлении от поверхности вглубь, таким образом, благодаря кооперативным процессам в дислокационной структуре происходит релаксация напряжений в кристалле.

Следовательно, как в моделировании, так и в практическом эксперименте мы наблюдаем способность кристалла к самоорганизации пластической деформации с целью сохранения своей целостности (живучесть системы).

На следующих масштабных уровнях (корреляционные длины  $L_2-L_4$ ), которые соответствуют размеру пачки плоскостей сдвига (состоит из множества параллельных следов, которые в свою очередь состоят из группы следов скольжения), также можно видеть тенденцию к сохранению квазипериодического характера формирования профиля поверхности, хотя и выраженное в меньшей степени (значения индекса Херста не достигает 0.5).

## Заключение

Проведенное в работе совместное рассмотрение результатов математического моделирования и экспериментальных исследований показало хорошую согласованность результатов и позволило показать целостную картину протекания пластической деформации на разных масштабных уровнях.

Моделирование показало, что для такого рода деформации (одноосное сжатие, малый размер образца, большая нагрузка) характерны фазовые переходы кристаллической решетки: сначала ГЦК–ОЦК, затем ОЦК–ГПУ. Перестройка кристаллической решетки может быть одним из вкладов в самоорганизацию пластической деформации кристалла. Кроме того, на атомном уровне отмечена склонность к образованию устойчивых дислокационных структур — в начале сжатия дислокации образуются в большом количестве на многих системах скольжения, в дальнейшем образуется устойчивая крестообразная структура из пересечения дислокаций, которая остается на протяжении всего моделирования.

Установлено, что способность к самоорганизации пластической деформации с целью сохранения своей целостности присуща кристаллу на всех масштабных уровнях и наиболее сильно проявляется на микроуровне. Данная закономерность подтверждена как в моделировании, так и в эксперименте.

Благодаря фрактальному анализу определены значения показателя Херста и корреляционные длины для [001]-монокристалла с боковыми гранями {110}. Разница в величине показателя Херста на микро- и мезоуровне указывает на различие в механизмах самоорганизации пластической деформации. На микроуровне механизмом является поочередное зарождение и аннигиляция дислокаций. На этом уровне способность к сохранению целостности самая высокая. На мезоуровне самоорганизация осуществляется за счет коррелированного сдвига в параллельных плоскостях скольжения. Благодаря указанным процессам мы можем наблюдать равномерное квазипериодическое распределение компонент деформации

по грани, что способствует сохранению живучести кристалла.

Экспериментальную часть исследования выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-32-60007 мол\_а\_дк.

Молекулярно-динамическое моделирование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания 3.2510.2017/ПЧ.

Авторы выражают благодарность профессору, д.ф.-м.н. Д.В. Лычагину за поддержку работы и к.ф.-м.н. В.С. Красникову за помощь в моделировании.

## Список литературы

- [1] Kahloun C., Monnet G., Queyreau S., Le L.T., Franciosi P. // Int. J. Plast. 2016. Vol. 84. N 6. P. 277–298. DOI: 10.1016/j.ijplas.2016.06.002.
- [2] Cai M., Langford S.C., Thomas Dickinson J. // Acta Mater. 2008. Vol. 56. N 20. P. 5938–5945. DOI: 10.1016/j.actamat.2008.08.015.
- [3] Kramer D.E., Savage M.F., Levine L.E. // Acta Mater. 2005. Vol. 53. N 17. P. 4655–4664. DOI: 10.1016/j.actamat.2005.06.019
- [4] Mecif A., Bacroix B., Franciosi P. // Acta Mater. 1997. Vol. 45. N 1. P. 371–381. [http://dx.doi.org/10.1016/S1359-6454\(96\)00094-8](http://dx.doi.org/10.1016/S1359-6454(96)00094-8).
- [5] Лычагин Д.В., Алфёрова Е.А., Старенченко В.А. // Физическая мезомеханика. 2010. Т. 13. Вып. 3. С. 75–88. [Lychagin D.V., Alfeyorova E.A., Starenchenko V.A. // Phys. Mesomech. 2011. Vol. 14. N 1–2. P. 66–78.]
- [6] Ляпунова Е.А., Петрова А.Н., Бродова И.Г., Наймарк О.Б., Соколов М.А., Чудинов В.В., Уваров С.В. // Физическая мезомеханика. 2012. Т. 2. Вып. 15. С. 61–67.
- [7] Alfeyorova E.A., Lychagin D.V. // Mech. Mater. 2018. Vol. 117. P. 202–213. DOI: 10.1016/j.mechmat.2017.11.011
- [8] Alfeyorova E.A., Lychagin D.V. // Lett. Mater. 2017. Vol. 7. N 2. DOI: 10.22226/2410-3535-2017-2-155-159
- [9] Girardin G., Huvier C., Delafosse D., Feaugas X. // Acta Mater. 2015. Vol. 91. P. 141–151. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.03.016
- [10] Малыгин Г.А. // УФН. 1999. Т. 169. № 9. С. 979–1010.
- [11] Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Панин А.В. // Физическая мезомеханика. 2006. Т. 8. Вып. 3. С. 9–22.
- [12] Малыгин Г.А. // ФТТ. 2007. Т. 49. Вып. 8. С. 1392–1397.
- [13] Красников В.С., Куксин А.Ю., Майер А.Е., Янцкин А.В. // ФТТ. 2010. Т. 52. Вып. 7. С. 1295–1304.
- [14] Krasnikov V.S., Mayer A.E., Yalovets A.P. // Int. J. Plast. 2011. Vol. 27. N 5. P. 1294–1308. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.02.008
- [15] Komanduria R., Chandrasekaran N., Raff L.M. // Int. J. Mech. Sci. 2001. Vol. 43. P. 2237–2260.
- [16] Chen Y., Zhou L., He W., Sun Y., Li Y., Jiao Y., Luo S. // Eur. Phys. J. B. 2017. Vol. 90. N 16. DOI: 10.1140/epjb/e2016-70388-7
- [17] Wang K., Xiao S., Deng H., Zhu W., Hu W. // Int. J. Plasticity. 2014. Vol. 59. P. 180–198. DOI: 10.1016/j.ijplas.2014.03.007
- [18] Кукса Л.В., Ковальчук Б.И., Лебедев А.А. и др. // Проблемы прочности. 1976. № 3. С. 55–59.

- [19] *Plimpton S.* // J. Comp. Phys. 1995. Vol. 117. P. 1–19.  
DOI: 10.1006/jcph.1995.1039
- [20] *Mishin Y., Farkas D., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A.* // Phys. Rev. B 1999. Vol. 59. P. 3393.  
DOI: 10.1103/PhysRevB.59.3393
- [21] *Stukowski A.* // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. Vol. 18. P. 015012.
- [22] *Панин В.Е., Панин Л.Е.* // Физическая мезомеханика. 2004. Т. 4. Вып. 7. P. 5–23.
- [23] *Конева Н.А.* // Соросовский образовательный журнал. 1996. № 6. P. 99–107.
- [24] *Zhang X.Y., Wu X.L., Liu Q., Zuo R.L., Zhu A.W., Jiang P., Wei Q.M.* // Appl. Phys. Lett. 2008. Vol. 93. P. 031901.  
DOI: 10.1063/1.3062849
- [25] *Золотых Т.А., Косилов В.В., Ожерельев В.В.* // Компьютерные исследования и моделирование. 2013. Т. 5. № 2. С. 225–230.
- [26] *Zhang X.Y., Wu X.L., Liu Q., Zuo R.L., Zhu A.W., Jiang P., Wei Q.M.* // Appl. Phys. Lett. 2008. Vol. 93. P. 031901.  
DOI: 10.1063/1.2953545
- [27] *Wen Y., Wu S., Zhang J., Zhu Z.* // Solid State Commun. 2008. Vol. 146. P. 253–257.
- [28] *Гуляев А.П.* Металловедение. Учебник для вузов. 6-е изд. М.: Металлургия, 1986. 544 с.
- [29] *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
- [30] *Yang H.-N., Zhao Y.-P., Chan A., Lu T.-M., Wang G.-C.* // Phys. Rev. B. 1997. Vol. 56. N 7. P. 4224–4232.  
DOI: 10.1103/PhysRevB.56.4224
- [31] *Pelliccione M., Lu T.-M.* Evolution of Thin Film Morphology. Modeling and Simulations. NY.: Springer, 2008. 206 p.
- [32] *Аптуков В.Н., Митин В.Ю., Скачков А.П.* // Вестник Пермского ун-та. Математика. Механика. Информатика. 2010. Т. 4. Вып. 4. С. 30–33.
- [33] *Новиков И.И.* Дефекты кристаллического строения металлов. Уч. пособ. для вуза. М.: Металлургия, 1975. 208 с.